

BERICHTE
DER
ARBEITSGRUPPE TECHNOMATHEMATIK

FORSCHUNG - AUSBILDUNG - WEITERBILDUNG

BERICHT NR. 7

³²⁰
UMSTRÖMUNG VON ECKEN UND KANTEN

³³⁵
TH. MIETZNER

³³⁵
Zwischenbericht zum DFG-Projekt Simulation von Wirbeln

UNIVERSITÄT KAISERSLAUTERN
FACHBEREICH MATHEMATIK
ERWIN-SCHRÖDINGER-STRASSE
6750 KAISERSLAUTERN
⁴¹⁰

OKTOBER 1984
⁴²⁵

Zwischenbericht zum DFG-Projekt
"Umströmung von Ecken und Kanten"

1. Einleitung

In diesem Projekt soll die Bildung von Wirbeln bei der Strömung eines Gases um eine Ecke numerisch untersucht werden. Dabei sollen verschiedene numerische Verfahren getestet und die Ergebnisse mit Versuchsdaten verglichen werden. Ferner soll untersucht werden, wie gut sich diese Verfahren vektorisieren lassen, da kompliziertere zweidimensionale und selbst einfache dreidimensionale Probleme der Strömungsdynamik auf den heute üblichen Universalrechnern nicht mit vertretbarem Zeitaufwand zu lösen sind. ~~Besonders, wenn, wie an der Universität Kaiserslautern, nur eine relativ langsame Anlage (Siemens 7551/7561) zur Verfügung steht.~~ Die numerischen Rechnungen werden auf der CYBER 205 in Karlsruhe durchgeführt.

Da Wirbel ebenso wie die Umströmung von Ecken mit großen Gradienten in den Strömungsgrößen verbunden sind, suchten wir nach numerischen Verfahren, die dafür bekannt sind, daß sie mit diesen Problemen besonders gut fertig werden. Wir wählten den GAP-Algorithmus (grid and particles) von B.M. Marder [1] und das mehrdimensionale FCT-Verfahren (flux-corrected transport) von S.T. Zalesak [2,3] als Konkurrenzmethoden. Das physikalische Beispiel stammt aus der Dissertation von H. Hassenpflug [4]:

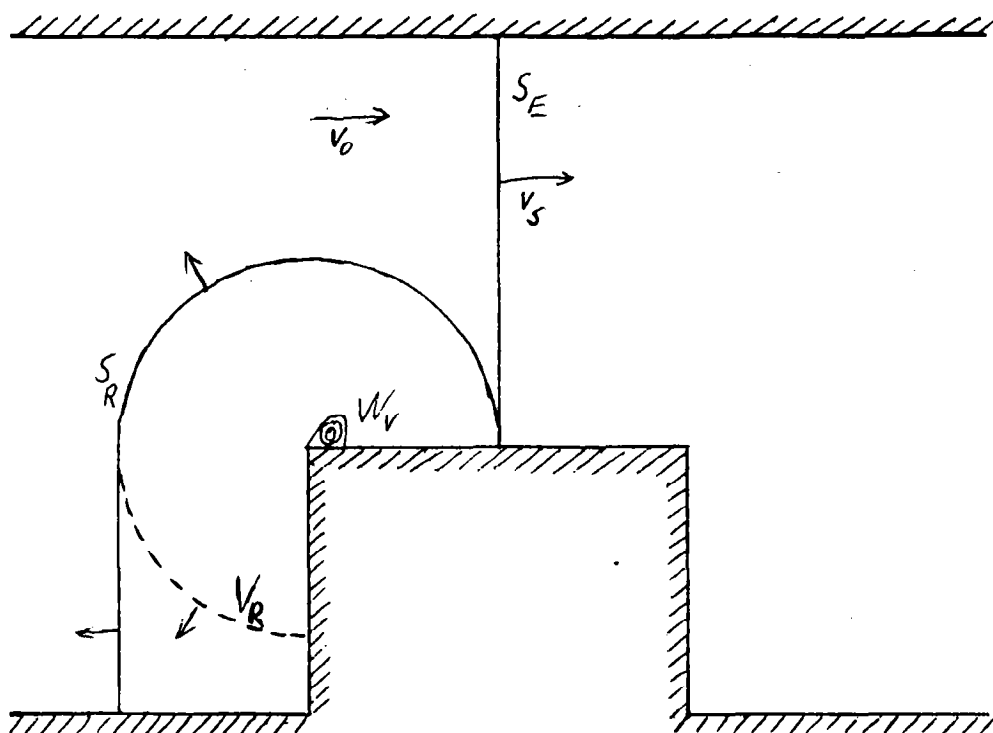


Abb. 1a:

Auf dem Boden eines Schlitzes liegt ein (rechteckiger) Quader großer Tiefe. Das Gas in seiner Umgebung ruht bei Atmosphärendruck und Zimmertemperatur. Durch den Schlitz läuft eine Stoßwelle senkrecht auf den Quader zu. In Abb. 1a ist der Zustand des Gases dargestellt, wenn der einfallende Stoß S_E die Vorderkante des Quaders gerade überlaufen hat: Er wird von der Quaderfront reflektiert (S_R), und der reflektierte Stoß wird an der Oberkante gebeugt. Durch die Beugung entsteht eine Verdünnungswelle V_R , die zum Boden des Schlitzes läuft. Kurz hinter der stromaufwärtigen Kante zeigen Hassenpflugs Messungen ein Gebiet W_V sehr geringer Dichte, das er als Vorderkantenwirbel bezeichnet.

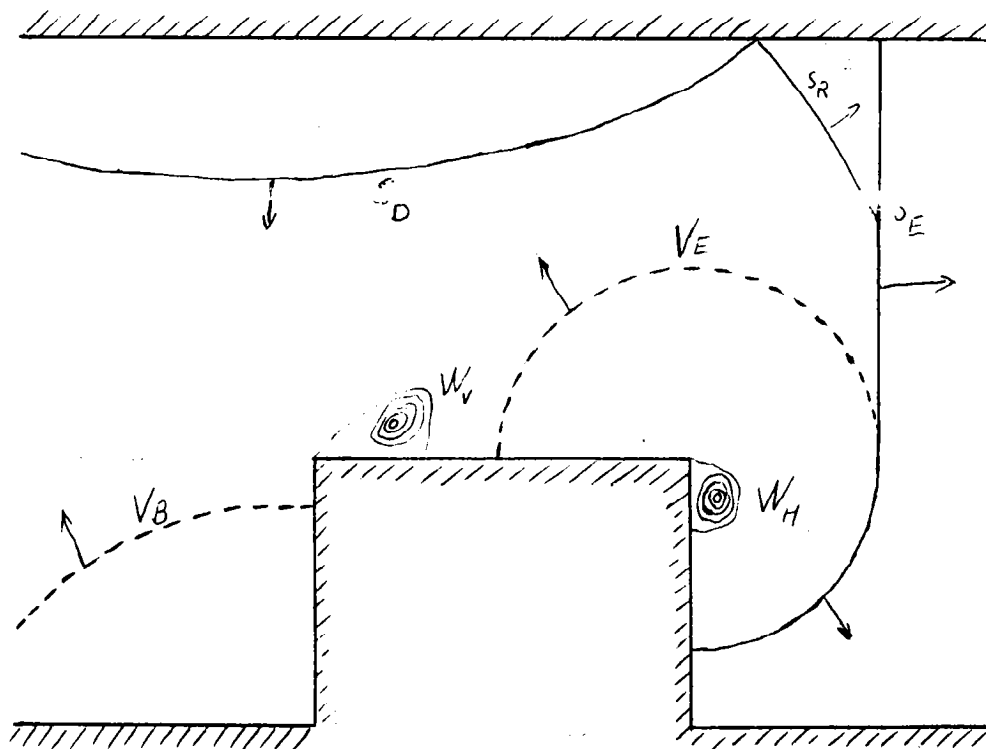


Abb. 1b

Abb. 1b zeigt schematisch die Situation des Gases, wenn der einfallende Stoß die Hinterkante gerade überlaufen hat. Mittlerweile ist die Verdünnungswelle V_R am Boden zu V_B reflektiert worden. Ebenso ist der gebeugte Teil des Stoßes S_R nach dem Auftreffen auf die Decke in den nach unten laufenden Stoß S_D übergegangen. Das Wirbelgebiet W_V hat sich vergrößert und ist stromabwärts gezogen. Der einfallende Stoß S_E ist an der Hinterkante gebeugt worden. Dieser Vorgang hat eine zweite Verdünnungswelle V_E erzeugt, die zur Decke läuft. Schließlich ist ein zweites Gebiet geringer Dichte W_H entstanden.

Neben vielen Interferogrammen, die die Dichteverteilung sichtbar machen, enthält

die Arbeit von Hassenpflug quantitative Aussagen über die Dichte- und Geschwindigkeitsverteilung im Hinterkantenwirbel, über die Bahn beider Wirbel und über die Entwicklung der Dichteverteilung auf der Quaderoberfläche.

Wir wollen die Hypothese untersuchen, daß die Wirbel ausschließlich durch Stoßwellenbeugung und nicht durch Grenzschichteffekte entstehen. Reibung und Wärmeleitung werden wir daher vernachlässigen. Wir betrachten also ein ideales Gas der Dichte ρ , Geschwindigkeit $v = (v_x, v_y)$ und spezifischen inneren Energie e , dessen Zustand nur von zwei Ortskoordinaten x, y abhängt. Die z -Komponente von v verschwindet. Dieses Gas genügt den Gleichungen

$$(1) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0 \quad \text{Kontinuitätsgleichung,}$$

$$(2) \quad \frac{Dv}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \quad \text{Impulserhaltung,}$$

$$(3) \quad \frac{De}{Dt} = -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot v \quad \text{Energieerhaltung,}$$

$$(4) \quad p = (\gamma - 1) \rho e \quad \text{Zustandsgleichung.}$$

Dabei bezeichnet p den Druck, $\gamma = c_0/c_v$ das Verhältnis der spezifischen Wärmen und $\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \nabla$ die substantielle Ableitung. Die Erdanziehung wird vernachlässigt. Um zu erklären, wie bei der Stoßwellenbeugung in einem idealen Gas Wirbel entstehen können, leiten wir eine Evolutionsgleichung für den Wirbelvektor $w = \nabla \times v$ her. Dabei benützen wir die Beziehung

$$(v \cdot \nabla) v = \frac{1}{2} \nabla \|v\|^2 - v \times \omega$$

und das thermodynamische Gesetz

$$dh = T ds + \frac{1}{\rho} dp,$$

in dem h die spezifische Enthalpie,
 T die absolute Temperatur und
 s die spezifische Entropie
bedeuten. Aus dieser Gleichung erhält man

$$\frac{1}{\rho} \nabla p = \nabla h - T \nabla s.$$

Einsetzen in (2) ergibt

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla \|v\|^2 - v \times \omega = T \nabla s - \nabla h.$$

Wir berechnen die Rotation von beiden Seiten:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} - \nabla \times (\mathbf{v} \times \omega) = \nabla T \times \nabla s$$

oder

$$(5) \quad \frac{D\omega}{Dt} - (\omega \cdot \nabla) \mathbf{v} + \omega (\nabla \cdot \mathbf{v}) = \nabla T \times \nabla s .$$

Bei ebenen Strömungen verschwindet der zweite Term der linken Seite, da der Wirbelvektor senkrecht zur Strömungsebene steht. Gleichung (5) zeigt, daß Wirbel in der Strömung überall dort entstehen, wo Entropie und Temperatur Gradienten haben, die nicht parallel zueinander sind. Solange nun der Stoß den Quader nicht erreicht hat, herrschen vor und hinter ihm verschiedene, aber räumlich konstante Strömungsbedingungen. Im gebeugten Stoß ändern sich von Ort zu Ort die Stoßmachzahl und der Winkel zwischen Anströmrichtung und Stoßtangente. Diese beiden Parameter bestimmen über die Rankine-Hugoniot-Bedingungen den Zustand des Gases hinter dem Stoß und erzeugen so die zur Wirbelbildung nötigen Temperatur- und Entropiegradienten.

In den zwei folgenden Paragraphen wollen wir die beiden numerischen Verfahren detailliert beschreiben.

2. GAP in zwei Dimensionen

Der Name dieses Verfahrens deutet schon an, daß es Teilchen durch ein Gitter wandern läßt: Das Gas wird in N kleine Bezirke eingeteilt, die eine gewisse Masse M und ein Volumen U besitzen. Sie haben ferner einen Schwerpunkt X, eine Geschwindigkeit V und eine innere Energie E. Die erste Approximation besteht nun darin, während der Rechnung ρ , V und E als über den ganzen Bezirk konstant anzunehmen. Im Gegensatz zu den Lagrangeschen Verfahren werden hier nicht die Bezirksränder, sondern der Bezirksmittelpunkt verfolgt.

Die Bewegungsgleichungen für die Teilchen lauten nun mit $U_n = M_n / \rho(X_n)$:

$$(1') \quad \dot{X}_n = V_n$$

$$(2') \quad \dot{V}_n = -U_n / M_n \nabla p(X_n) .$$

Die Evolutionsgleichung für die innere Energie wollen wir etwas umformen.

Es gilt wegen (1)

$$\frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) = - \frac{1}{\rho^2} \frac{D\rho}{Dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{v}$$

und daher

$$\frac{De}{Dt} = -p \frac{D}{Dt} \frac{1}{\rho}.$$

Ein Vergleich mit dem thermodynamischen Gesetz

$$de = Tds - p d \frac{1}{\rho}$$

zeigt, daß Gase ohne Viskosität und Wärmeleitung isentrop sind: Die Entropie ist entlang Teilchenbahnen konstant. Mit $E_n = M_n \cdot e_n$ und $U_n = M_n / \rho(X_n)$ erhält man nun die Gleichung

$$(3') \quad \dot{E}_n = -p \dot{U}_n \quad \text{oder} \quad dE_n = -p dU_n.$$

Um die Gleichungen (1'), (2'), (3') lösen zu können, müssen wir einerseits den Druck und seinen Gradienten kennen und benötigen andererseits eine Berechnungsvorschrift für die Dichte $\rho(X_n)$. Dazu wird das Rechengebiet in kleine Rechtecke (Zellen) der Fläche $\Delta x \cdot \Delta y$ eingeteilt und jedes Teilchen mit einer charakteristischen Funktion x_n derselben Form mit Schwerpunkt X_n versehen, wie in Abb. 2 dargestellt.

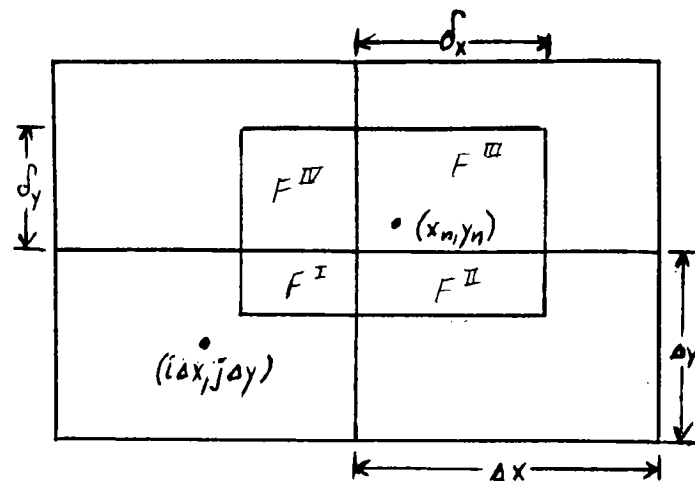


Abb. 2

Die Masse in einer Zelle C ergibt sich nun als

$$(6) \quad M_C = \frac{1}{\Delta x \cdot \Delta y} \iint_C \sum_{n=1}^N M_n x_n(x, y) dx dy$$

und daraus die Zellendichte $\rho_C = M_C / \text{Volumen}(C)$. Als Volumen einer Zelle bezeichnen wir dabei den Teil ihrer Fläche, der zum Strömungsgebiet gehört (Randzellen können über den physikalischen Rand hinausragen). Analog zu M_C

wird die innere Energie E_C berechnet. Daraus ergibt sich der Druck in der Zelle C zu

$$(7) \quad p_C = (\gamma-1)E_C/\text{Volumen } (C) .$$

Eine Näherung seines Gradienten berechnen wir an den Gittermittelpunkten:

$$(8) \quad \begin{aligned} \left(\frac{\tilde{p}}{\partial x}\right)_{i+1/2,j+1/2} &= (p_{i+1,j+1} - p_{i,j+1} + p_{i+1,j} - p_{i,j})/(2\Delta x) \\ \left(\frac{\tilde{p}}{\partial y}\right)_{i+1/2,j+1/2} &= (p_{i+1,j+1} - p_{i+1,j} + p_{i,j+1} - p_{i,j})/(2\Delta y) \end{aligned}$$

Sie hat die Genauigkeitsordnung $O(\Delta x^2 + \Delta y^2)$.

Aus den Gittergrößen erhält man nun durch bilineare Interpolation Teilchengrößen. So ergibt sich die Dichte $\rho(X_n)$ des n-ten Teilchens zu

$$(9) \quad \begin{aligned} \rho(X_n) &= \frac{1}{\Delta x \cdot \Delta y} [(\delta_x \rho_{i+1,j} + (\Delta x - \delta_x) \rho_{i,j})(\Delta y - \delta_y) + (\delta_x \rho_{i+1,j+1} + (\Delta x - \delta_x) \rho_{i,j+1}) \delta_y] \\ &= \frac{1}{\Delta x \cdot \Delta y} [\rho_{ij} F^I + \rho_{i+1,j} F^{II} + \rho_{i+1,j+1} F^{III} + \rho_{i,j+1} F^{IV}] . \end{aligned}$$

Analog werden $p(X_n)$ und $\tilde{v}p(X_n)$ berechnet.

Das System (1'), (2'), (3') gewöhnlicher Differentialgleichungen wird nun mit einem expliziten Einschrittverfahren gelöst: Ausgehend von "alten" Werten $x_n^a, v_n^a, E_n^a, p^a(x,y)$ zur Zeit t ergeben sich die "neuen" Werte (hochgestelltes n) zur Zeit $t+\Delta t$ aus den Formeln

$$(2^*) \quad v_n^n = v_n^a - \Delta t \frac{U_n^a}{M_n} (\tilde{v}p^a)(x_n^a),$$

$$(1^*) \quad x_n^n = x_n^a + v_n^n \Delta t .$$

Jetzt läßt sich ρ^n in den Zellen berechnen und daraus U_n^n wie oben beschrieben. Schließlich ergibt sich die neue innere Energie der Teilchen aus der Formel

$$(3^*) \quad E_n^n = E_n^a - \frac{1}{2}(p^a(x_n^n) + p^a(x_n^a)) \cdot (U_n^n - U_n^a) .$$

Bevor nun mit der Berechnung des neuen Gitterdruckes der nächste Zeitschritt beginnen kann, muß für die Stabilität des Verfahrens gesorgt werden. Dazu werden die Geschwindigkeiten und inneren Energien benachbarter Teilchen einander

angepaßt. Die einfachste Technik bestünde darin, die Zellenimpulse P_C analog zu Formel (6) zu berechnen, um die Zellengeschwindigkeit $V_C = P_C / \rho_C$ zu erhalten. Die neuen Teilchengeschwindigkeiten \tilde{V}_n entstünden dann durch bilineare Interpretation. Dabei bleibt der Gesamtimpuls erhalten, aber die kinetische Energie der Teilchen ändert sich. Die Differenz wird der inneren Energie zugeschlagen:

$$(10) \quad \tilde{E}_n = E_n - \frac{1}{2} M_n (|\tilde{V}_n|^2 - |V_n|^2).$$

Dieses Verfahren hat zwei Nachteile:

- a) Bei kleinen Zeitschritten Δt wird häufiger, also stärker geglättet.
- b) Es erhöht auch in Verdünnungswellen die innere Energie und damit die Entropie, was bei Gasen ohne Reibung und Wärmeleitung nur in Verdichtungsstößen zu erwarten ist.

Aus diesen Gründen ergänzt Marder die oben beschriebene Glättungstechnik durch einen Gewichtungsfaktor F_n der Form

$$(11) \quad F_n = \begin{cases} 1 & F_n^* \geq 1 \\ 0 & F_n^* \leq 0 \\ F_n^* & \text{sonst} \end{cases}, \quad F_n^* = \alpha \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta t \cdot \frac{\tilde{d}}{dt} \frac{1}{U_n}.$$

Dabei ist $\frac{\tilde{d}}{dt} \frac{1}{U_n} = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{1}{U_n} - \frac{1}{U_n^a} \right)$ eine Näherungsformel für die Zeitableitung und α

ein positiver Gewichtungsfaktor. Der Faktor $\Delta x \cdot \Delta y$ nondimensionalisiert den Kehrwert des Teilchenvolumens und der Faktor Δt behebt den Nachteil a) des naiven Verfahrens. Da F_n^* für expandierende Teilchen negativ wird, ist auch eine Entropieerhöhung in Verdünnungswellen ausgeschlossen. Nun ergibt sich die Glättungsgeschwindigkeit \bar{V}_C in der Zelle C zu

$$(12) \quad \bar{V}_C = \frac{\iint_C \sum_{n=1}^N M_n F_n V_n x_n(x,y) dx dy}{\iint_C \sum_{n=1}^N F_n M_n x_n(x,y) dx dy}$$

und daraus die neue Teilchengeschwindigkeit \tilde{V}_n als

$$\tilde{V}_n = V_n + F_n (\bar{V}_C(x_n) - V_n),$$

wobei $\bar{V}_C(x_n)$ aus den \bar{V}_C durch lokale bilineare Interpolation entsteht (vgl. 9). Die äquivalente Formel

$$(13) \quad \bar{V}(X_n) = \sum_C \frac{1}{\Delta x \cdot \Delta y} \iint_C \bar{V}_C x_n(x,y) dx dy$$

hilft beim Beweis der Impulserhaltung:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N M_n \tilde{V}_n - \sum_{n=1}^N M_n V_n &= \sum_{n=1}^N M_n F_n \bar{V}(X_n) - \sum_{n=1}^N M_n F_n V_n \\ &= \sum_{n=1}^N \sum_C \frac{1}{\Delta x \cdot \Delta y} \bar{V}_C \iint_C M_n F_n x_n(x,y) dx dy - \sum_{n=1}^N M_n F_n V_n \\ &= \sum_C \frac{1}{\Delta x \cdot \Delta y} \iint_C \sum_{n=1}^N M_n F_n V_n x_n(x,y) dx dy - \sum_{n=1}^N M_n F_n V_n \\ &= \sum_n M_n F_n V_n \frac{1}{\Delta x \cdot \Delta y} \sum_C \iint_C x_n(x,y) dx dy - \sum_{n=1}^N M_n F_n V_n = 0. \end{aligned}$$

Die Erhaltung der Gesamtenergie wird durch die Formel (10) sichergestellt. Dann wird mit entsprechenden Formeln die innere Energie geglättet.

Das Kernstück des GAP-Algorithmus ist damit beschrieben. Er umgeht die Probleme mit steilen Gradienten bei konvektiven Termen durch die Einführung von Teilchen. Auf diese Weise gehen substantielle Ableitungen über in reine Zeitableitungen. Andererseits ist das Verfahren (bis auf den Glättungsteil, der schwer abschätzbar ist) nur von der Genauigkeitsordnung $O(\Delta t + \Delta x^2 + \Delta y^2 + \frac{1}{N})$, so daß es für glatte Strömungsvorgänge ungeeignet erscheint. Als explizites Verfahren schließlich sollte es nicht für die Berechnung stationärer Zustände eingesetzt werden.

Um gleichzeitig GAP und den Vektorrechner kennenzulernen, haben wir zwei ein-dimensionale Testbeispiele gerechnet, deren exakte Lösung bekannt ist: Die Ausströmung eines zunächst ruhenden Gases ins Vakuum (Verdünnungswelle) und das Membranproblem. Hier wird ein Rohr durch eine Membran in zwei Teile geteilt, die beide ruhendes Gas in jeweils räumlich homogenem thermodynamischem Zustand enthalten. Die Drücke und Dichten der beiden Teile unterscheiden sich jedoch. Die Rechnung beginnt mit dem Platzen der Membran. Das Gas mit dem höheren Druck beginnt sich auszudehnen. Es entwickeln sich eine Stoßwelle, eine Kontaktunstetigkeit und eine Verdünnungswelle. Die Abbildungen 3a und 3b zeigen die Zellenwerte der GAP-Lösung und die exakte Lösung. Das Rechengebiet ist das Intervall $[0,1]$. Die Ränder reflektieren energieerhaltend. Zur Zeit $t=0$ wird die Membran bei $X=0.5$ gesprengt. Das Anfangsverhältnis der Dichten beträgt 2, das der spezifischen inneren Energien 1.8. Das Verhältnis γ der spezifischen Wärmen hat den Wert $\frac{5}{3}$.

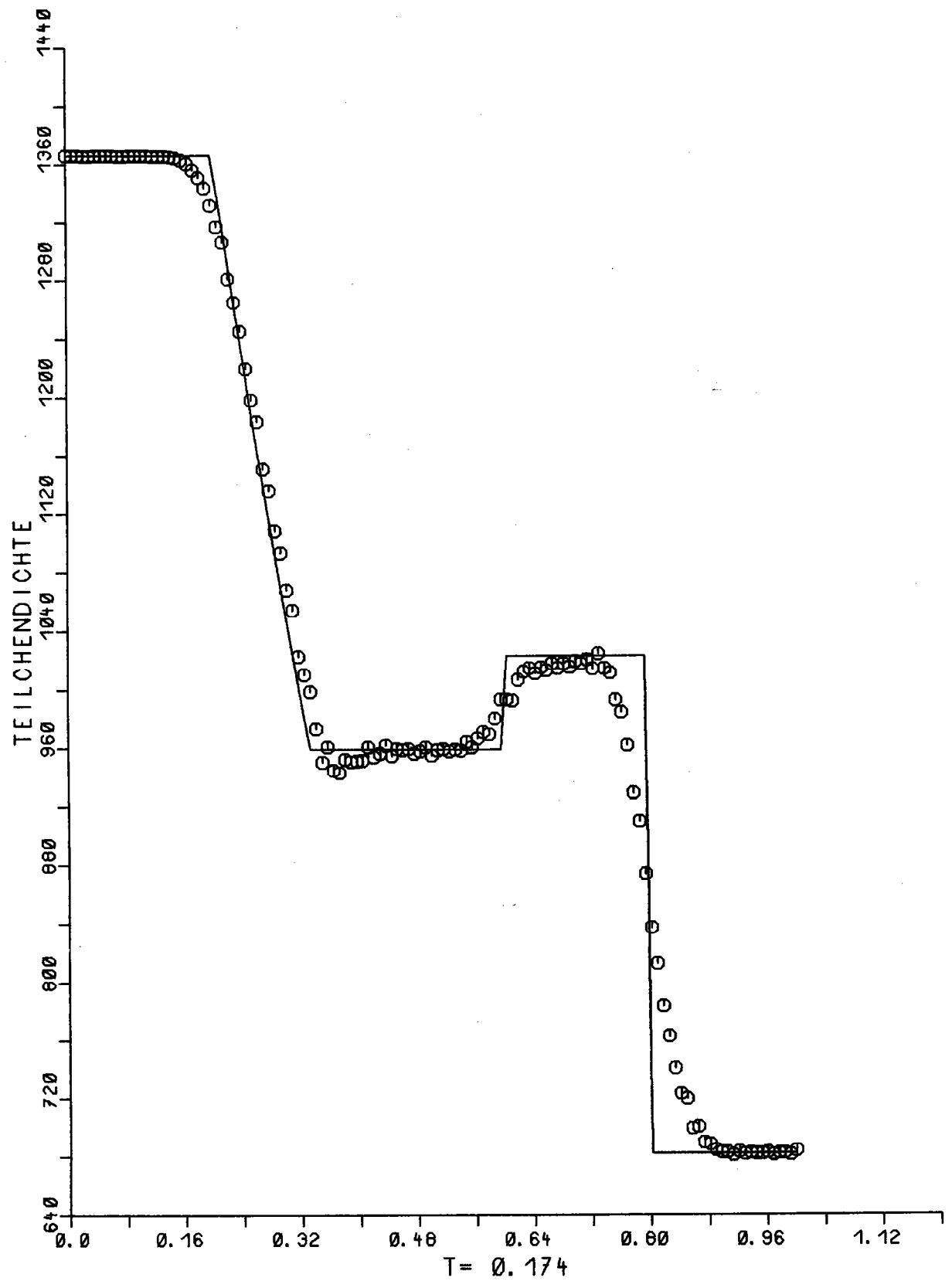


Abb. 3a

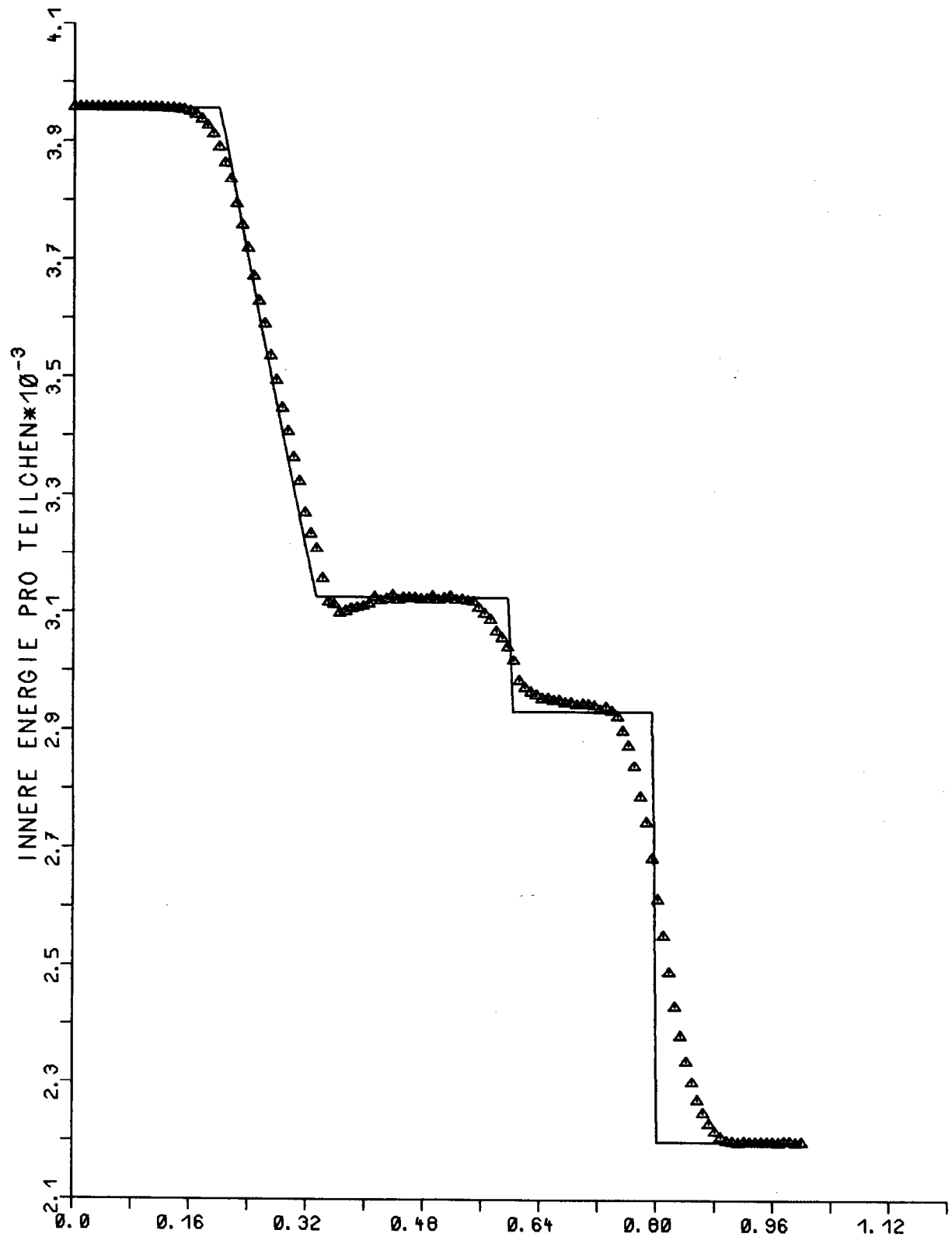


Abb. 3b

1024 Teilchen mit identischer Masse sind auf 127 Zellen verteilt. Der Faktor α aus Formel (11) hat den Wert 100. Der Zeitschritt Δt wird dynamisch nach der Formel

$$\Delta t = 0.2 \cdot \Delta x / (|v| + c)_{\max}$$

bestimmt, wobei c die lokale Schallgeschwindigkeit bezeichnet. Man erkennt auf den Bildern, daß alle drei Phänomene gut reproduziert werden. Hinter der Stoßwelle entstehen keine Oszillationen. Da die Glättung in der Verdünnungswelle abgeschaltet ist, wird hier keine unerwünschte innere Energie produziert.

Im nächsten Schritt versuchten wir die Entstehung eines Wirbels hinter einer plötzlichen Schlitzerweiterung zu simulieren. Dies ist wohl das einfachste Beispiel einer ebenen Strömung mit Wirbelentstehung an einer Ecke. Der enge Teil des Schlitzes wird durch die Menge $[0, x_0] \times [y_0, 1]$, der weite Teil durch $[x_0, x_{\max}] \times [0, 1]$ dargestellt. Zur Erzeugung von Wirbeln müssen hier die Navier-Stokes-Gleichungen mit den entsprechenden Randbedingungen benutzt werden. Dabei wurden Viskosität und Wärmeleitung mit zentralen Differenzen zweiter Ordnung auf dem Gitter approximiert und die so errechneten Änderungen der Geschwindigkeit $\frac{\partial}{\partial t} v$ und der inneren Energie $\frac{\partial}{\partial t} e$ zu den Teilchenorten interpoliert.

Um die Bedingung haftenden Gases an festen Rändern zu simulieren, schrieben wir das Reflexionsgesetz $v_n^n = -v_n^a$ für Teilchen vor, die auf solch einen Rand treffen. Mittelt man die simulierte Gasgeschwindigkeit am Rand in einem kleinen Raumzeitbereich, so entsteht nur bei dieser Reflexionsvorschrift die Haftrandbedingung.

Wärmeübergang zwischen Wand und Gas wurde nicht vorgesehen.

Um die Anfangsverteilung der Teilchen festzulegen, erzeugen wir zunächst eine Approximation der Gleichverteilung auf dem Einheitsquadrat durch eine Summe von δ -Maßen mit Hilfe der Hammersley-Folge von $N = 2^M$ Punkten: Hat die Zahl $m < N$ die Dualdarstellung $m = a_{M-1} \dots a_1 a_0$, so setzt man $h(m) = 0. a_0 a_1 \dots a_{M-1}$ und erhält daraus den Trägerpunkt des n -ten δ -Maßes ($1 \leq n \leq N$) zu

$$p_n = \left(\frac{n-0.5}{N}, h(n-1) \right).$$

Die so entstandene Verteilung hat eine viel geringere "Diskrepanz" zur Gleichverteilung, als viele Zufallsgeneratoren sie mit der gleichen Anzahl von Punkten produzieren. Unter der Diskrepanz zweier Wahrscheinlichkeitsverteilungen F, G auf $[0, 1] \times [0, 1]$ versteht man dabei den Wert

$$D(F,G) = \sup_{x \in [0,1]} 2 \left| \int x R(x) d(F-G) \right|$$

mit $R(x) = [0, x_1) \times [0, x_2)$. In unserem Falle haben wir

$$F(x) = x_1 \cdot x_2, \quad dG(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta(x - P_n).$$

Die entstandene Punkteverteilung wird dann auf das Rechengebiet so transformiert, daß dabei die Gleichverteilung in die Anfangsdichte des Gases übergeht. Alle Teilchen erhalten dieselbe Masse.

Am Anfang ruht das Gas in $[x_0, x_{\max}] \times [0, y_0]$ und wird durch eine Membran vom oberen Teil des Schlitzes getrennt. Dort steigt die Geschwindigkeit linear von $(0,0)$ auf $(v_0, 0)$, $v_0 > 0$, an. Die obere Wand bewegt sich mit dieser Geschwindigkeit. Dichte ρ_0 und Druck p_0 sind überall gleich. In $[x_u, 0] \times [y_0, 1]$, $x_u < 0$, werden Teilchen in Reserve gehalten. Sie strömen mit vorgegebenen Zustandsgrößen und konstanter Geschwindigkeit, die den Anfangsbedingungen bei $x=0$ entsprechen, in das Rechengebiet hinein. Bei x_{\max} strömen sie frei aus dem Rechengebiet.

Zur Zeit $t=0$ wird die Membran gesprengt und das Gas hinter der Stufe allmählich durch die obere Strömung mitgerissen. Bei unseren Rechnungen verwendeten wir $v_0 = 1$ und $\rho_0 = 1$, die Machzahl 0.3, die Reynoldszahl 100, die Prandtlzahl $Pr = \gamma = 1.4$ und den Dämpfungsfaktor $\alpha = 100$ (vgl. (11)).

Da uns nicht die volle Kapazität des Vektorrechners in Karlsruhe zur Verfügung stand, konnten wir das Strömungsgeschehen nicht über längere Zeiträume verfolgen. Statt dessen experimentierten wir mit verschiedenen Details des Verfahrens. Da wir eine Unterschallströmung simulierten, hatten die Ausflußrandbedingungen bei x_{\max} erhebliche Auswirkungen auf die Strömung im Inneren. Die besten Ergebnisse entstanden durch Übertragung der Zellgrößen von der vorletzten Spalte (Zellmitte $x_{\max} - \Delta x$) auf die letzte (Zellmitte x_{\max}). Bei $x=0$ berechneten wir nicht die Zellgrößen aus den Teilchengrößen, sondern gaben die konstanten Einstrombedingungen vor. Diese Spalte von Randzellen hat nur das Volumen $\frac{1}{2} \Delta x \cdot \Delta y$, was zu verstärkten Fluktuationen der Zellgrößen führt.

Ferner ersetzten wir die charakteristische Funktion χ_n , die jedes Teilchen mit sich führt, durch die Funktion

$$(14) \quad \psi_n(x, y) = \begin{cases} \frac{3}{2} \left(1 - 4 \left(\frac{x - x_n}{\Delta x}\right)^2\right) \cdot \frac{3}{2} \left(1 - 4 \left(\frac{y - y_n}{\Delta y}\right)^2\right), & |x - x_n| \leq \frac{\Delta x}{2}, \quad |y - y_n| \leq \frac{\Delta y}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Auch sie besitzt das Integral $\Delta x \cdot \Delta y$ und hat denselben Träger wie χ_n , aber mit dem Vorteil der Stetigkeit. Andererseits werden Fluktuationen weniger gut ausgeglichen, da ψ_n die Randbereiche schwächer wichtet als χ_n . Dies führte nach kurzer Simulationszeit zu unerwünschten Unebenheiten im Druck.

Ein weiterer Test galt der Energiegleichung (3'). Marder schlägt vor, die neue innere Energie mit der Zustandsgleichung zu berechnen, indem man etwa

$$\frac{1}{2}(p^a(\chi_n^a) + p^a(\chi_n^n)) = (\gamma-1) \cdot \frac{1}{2}(E_n^a + E_n^n) / \left(\frac{1}{2}(U_n^a + U_n^n) \right)$$

nach E_n^n auflöst. Auch dies führte zu instabileren Resultaten als das Originalverfahren.

Schließlich versuchten wir die Evolutionsgleichungen (1'), (2'), (3') mit einem Prediktor-Korrektor-Verfahren 2. Ordnung zu diskretisieren. Die Resultate unterschieden sich kaum von denen des ursprünglichen Verfahrens.

Als explizites Verfahren ist auch der GAP-Algorithmus an die Courant-Friedrichs-Lewy-Bedingung gebunden. Wir erhielten stabile Resultate bei

$\Delta t \cdot (\|v\| + c)_{\max} \leq 0.4 \min(\Delta x, \Delta y)$, wobei c die lokale Schallgeschwindigkeit bezeichnet.

Im nächsten Schritt gingen wir zu dem in der Einleitung beschriebenen Problem über. Der Schlitz wird modelliert durch das Gebiet $[0, x_{\max}] \times [0, 1]$ (Längennormierung), in dem das Hindernis $[x_\ell, x_r] \times [0, y_0]$ eingelagert ist. Am unteren und oberen Schlitzrand sowie am Hindernis werden ankommende Teilchen spiegelreflektiert. Ein- und Ausströmbedingungen werden wie beim vorigen Problem behandelt. Zur Anfangszeit $t=0$ befindet sich bei $x_s < x_\ell$ eine ebene Schockwelle, die mit der Geschwindigkeit $v_s > 0$ den Schlitz entlangläuft. Vor ihr ruht das Gas mit der Dichte 1 (Massennormierung) und spezifischen inneren Energie 1 (Zeitnormierung). Der Zustand hinter der Stoßwelle ergibt sich aus den Rankine-Hugoniot-Bedingungen, wenn man die Machzahl $Ma = \frac{v_s}{c_0}$ vorgibt. c_0 ist die Schallgeschwindigkeit des Gases vor dem Stoß. Abbildung 4 zeigt Ergebnisse einer ersten Testrechnung zu diesem Problem mit 8192 Teilchen in 42×20 Zellen. Es ist $\gamma = 1.4$ und $Ma = 1.2$. Wir haben wieder $\alpha = 100$ verwendet. Der Zeitschritt wurde aus der Bedingung

$$\Delta t = 0.2 \Delta x / (\|v\| + c)_{\max}$$

berechnet.

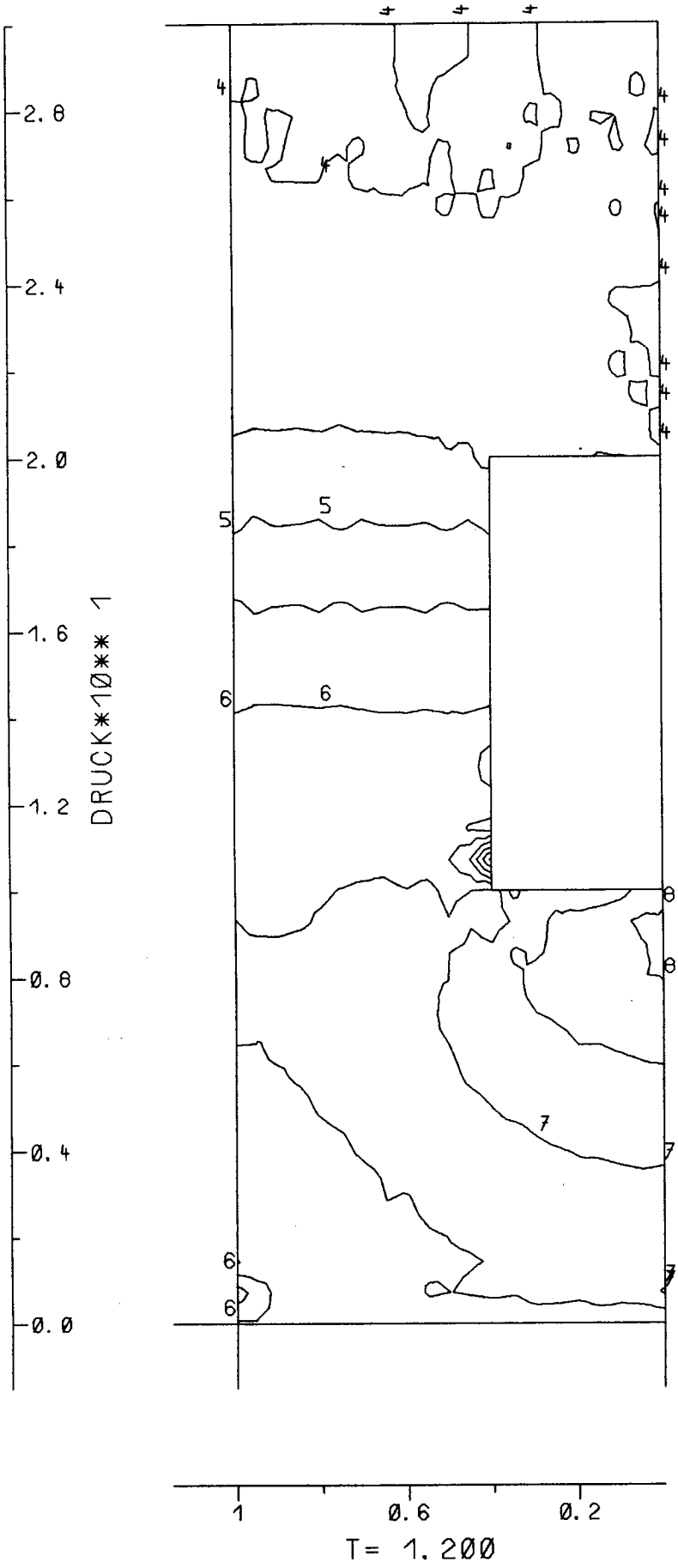
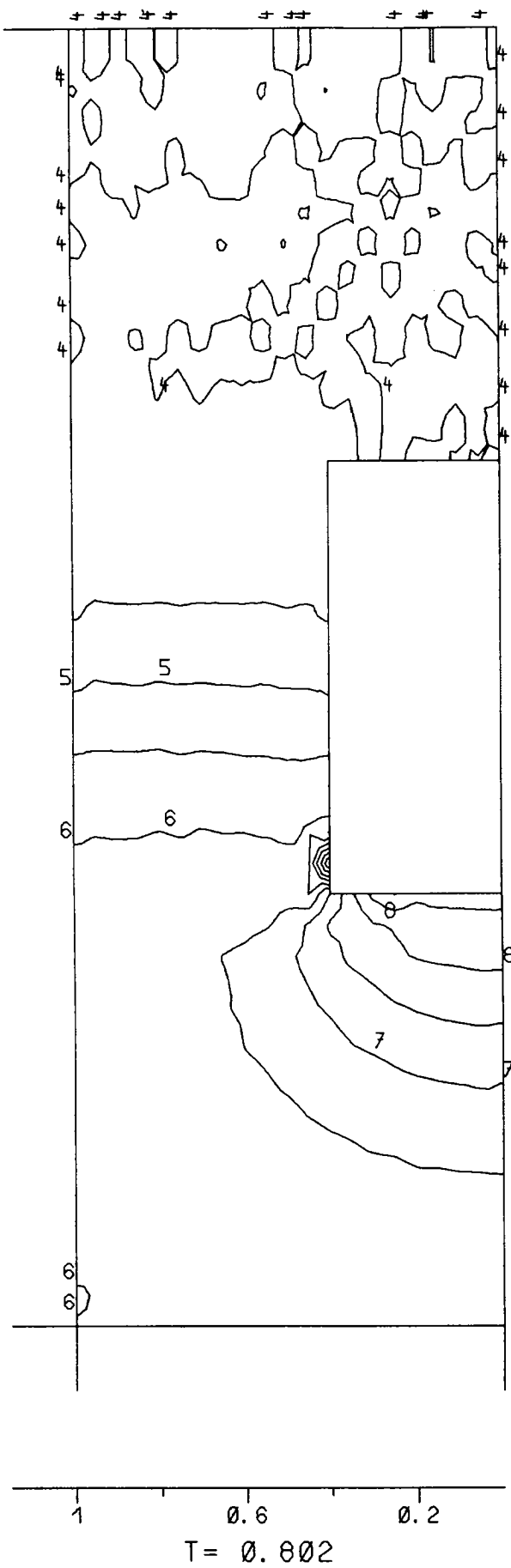


Abb. 4

Man erkennt sehr gut, wie der untere Teil der Stoßwelle am Quader reflektiert und gebeugt wird. Auch die Verdünnungswelle, die an der Vorderfront des Quaders herunterläuft, ist zu sehen. Der obere Teil des Stoßes läuft nahezu ungestört weiter, ist allerdings etwas aufgeweitet. Besonders interessant ist aber der starke Druckabfall direkt hinter der Vorderkante des Quaders, wie er auch von Hassenpflug beobachtet wurde.

Die zahlreichen Isobaren im rechten Teil des Schlitzes gehören alle zum Druckwert 0.4, der hier auch theoretisch angenommen werden soll. Der aus den Teilchen berechnete Druck schwankt leicht um diesen Wert.

Um die Möglichkeiten der CYBER auszunutzen, waren wir schon bald genötigt, die spezifischen FORTRAN-Erweiterungen dieser Anlage zu verwenden. Gerade logische Verzweigungen lassen sich sonst nur mit dem Skalarprozessor durchführen. Sie werden vom Compiler nicht vektorisiert.

Auf diese Weise ließ sich fast der gesamte Algorithmus parallelisieren. Nur die Berechnung der Zellgrößen aus den Teilchengrößen und der Randwerte blieben skalar. Die automatische Vektorisierung durch den Compiler benutzten wir schließlich nicht mehr.

3. Flux-corrected transport, mehrdimensional

Die FCT-Technik dient zur genauen Lösung von Erhaltungsgleichungssystemen der Form

$$(15) \quad w_t + f_x = 0$$

mit konservativen Differenzenverfahren. Diese lassen sich in der Form

$$(16) \quad w_i^n = w_i^a - \frac{1}{\Delta x} (F_{i+1/2} - F_{i-1/2})$$

darstellen.

Hat die exakte Lösung steile Gradienten oder Unstetigkeiten (wie z.B. Stoßwellen), so entstehen bei der numerischen Lösung der Gleichungen mit konservativen Verfahren höherer Ordnung unphysikalische Oszillationen in der Nähe dieser Gebiete. Deshalb führte man schon bald eine künstliche Viskosität zur Dämpfung dieser Oszillationen ein. In Regionen mit glatter exakter Lösung ist diese jedoch unerwünscht, weil sie die Genauigkeit des Verfahrens verringert. FCT nun berechnet die nötige künstliche Viskosität lokal in Abhängigkeit von der numerischen Lösung der Differentialgleichungen. Man bedient sich dabei zusätzlich eines

stark diffusiven Verfahrensniederer Ordnung. Grob gesagt, wird die Lösung höherer Ordnung mit derjenigen niederer Ordnung verglichen und überall dort abgeschnitten, wo sie Oszillationen aufweist, die bei der diffusiven Lösung nicht auftreten. Um jedoch ein konservatives Verfahren zu erhalten, wird nicht die Lösung selbst, sondern der Fluß F korrigiert. Dies erklärt den Namen der Technik.

Im einzelnen geht man folgendermaßen vor:

1. Berechne $F_{i+1/2}^D$, den Fluß des diffusiven Verfahrens.
2. Berechne $F_{i+1/2}^H$, den Fluß des Verfahrens höherer Ordnung.
3. Bezeichne mit $A_{i+1/2} = F_{i+1/2}^H - F_{i+1/2}^D$ den "antidiffusiven" Fluß.
4. Berechne die Lösung \tilde{w} des diffusiven Verfahrens am neuen Zeitpunkt:

$$(17) \quad \tilde{w}_i = w_i^a - \frac{1}{\Delta x} (F_{i+1/2}^D - F_{i-1/2}^D).$$

5. Verkleinere $A_{i+1/2}$ so, daß die Lösung w^n von Schritt 6 keine lokalen Extrema aufweist, die nicht schon in \tilde{w} oder w^a vorhanden waren:

$$(18) \quad A_{i+1/2}^C = C_{i+1/2} A_{i+1/2}, \quad 0 \leq C_{i+1/2} \leq 1.$$

6. Berechne die neue Lösung w^n zu

$$(19) \quad w_i^n = \tilde{w}_i - \frac{1}{\Delta x} (A_{i+1/2}^C - A_{i-1/2}^C).$$

Zalesak schlägt nun für den 5. Schritt vor, die antidiffusiven Flüsse

$$(20) \quad \begin{aligned} P_i^+ &= \max(0, A_{i-1/2}) - \min(0, A_{i+1/2}) \\ P_i^- &= -\min(0, A_{i-1/2}) + \max(0, A_{i+1/2}) \end{aligned}$$

in die Zelle hinein bzw. aus ihr heraus getrennt zu betrachten. Er berechnet einen Wert w_i^{\max} (w_i^{\min}) aus dem Maximum (Minimum) von w^a und \tilde{w} in den Zellen $i-1, i, i+1$. Eine hinreichende Bedingung für $w_i^{\min} \leq w_i^n \leq w_i^{\max}$ ist

$$(21) \quad \begin{aligned} w_i^{\max} &\geq \tilde{w}_i + c P_i^+ / \Delta x \\ w_i^{\min} &\leq \tilde{w}_i - c P_i^- / \Delta x \end{aligned}$$

Hieraus ergeben sich die Schranken

$$(22) \quad \begin{aligned} P_i^+ c &\leq Q_i^+ := \Delta x (w_i^{\max} - \tilde{w}_i) \\ P_i^- c &\leq Q_i^- := \Delta x (\tilde{w}_i - w_i^{\min}) \end{aligned}$$

Nun beeinflusst jeder Fluß zwei Zellen. Der zugehörige flußbegrenzende Faktor muß daher beide Zellen berücksichtigen. Setzt man

$$R_i^\pm = \min(1, Q_i^\pm / P_i^\pm),$$

wo erhält man mit der Formel

$$(23) \quad c_{i+1/2} = \begin{cases} \min(R_{i+1}^+, R_i^-) & \text{für } A_{i+1/2} \geq 0 \\ \min(R_i^+, R_{i+1}^-) & \text{für } A_{i+1/2} < 0 \end{cases}$$

zulässige Faktoren.

In zwei Dimensionen geht es um Systeme der Form

$$(24) \quad w_t + f_x + g_y = 0.$$

Konservative Differenzenverfahren zur approximativen Lösung dieser Gleichungen auf Rechteckgittern lassen sich in der Form

$$w_{i,j}^n = w_{i,j}^a - \frac{1}{\Delta x \Delta y} (F_{i+1/2,j} - F_{i-1/2,j} + G_{i,j+1/2} - G_{i,j-1/2})$$

schreiben. Dabei bezeichnen Δx bzw. Δy die Zellweiten in x - bzw. y -Richtung. Wir setzen $V = \frac{1}{\Delta x \Delta y}$. Bei jedem Gitterpunkt treten jetzt vier antidiffusive Flüsse auf (vgl. Abb. 5). Wieder werden alle Flüsse in die Zelle (i,j) und all diejenigen aus ihr heraus getrennt aufsummiert.

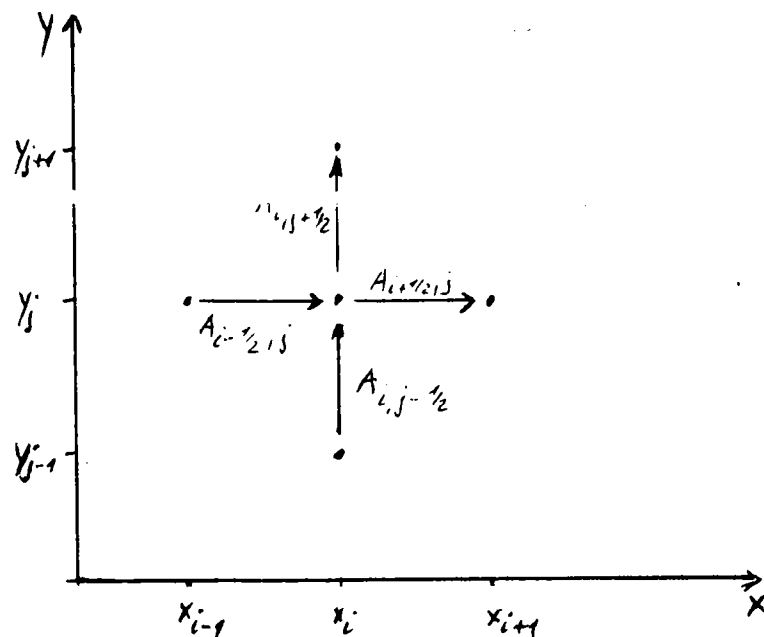


Abb. 5

Zur Bestimmung der Schranken $w_{i,j}^{\max}$ und $w_{i,j}^{\min}$ werden die alte und die diffusive neue Lösung in der Zelle (i,j) und ihren vier Nachbarzellen herangezogen. Die Formeln lauten jetzt:

$$P_{ij}^+ = \max(0, A_{i-1/2,j}) - \min(0, A_{i+1/2,j}) + \max(0, A_{i,j-1/2}) - \min(0, A_{i,j+1/2})$$

$$P_{ij}^- = \max(0, A_{i+1/2,j}) - \min(0, A_{i-1/2,j}) + \max(0, A_{i,j+1/2}) - \min(0, A_{i,j-1/2})$$

$$Q_{ij}^+ = v \cdot (w_{ij}^{\max} - \tilde{w}_{ij}), \quad Q_{ij}^- = v \cdot (\tilde{w}_{ij} - w_{ij}^{\min})$$

$$R_{ij}^\pm = \min(1, Q_{ij}^\pm / P_{ij}^\pm)$$

$$C_{i+1/2,j} = \begin{cases} \min(R_{i+1,j}^+, R_{ij}^-), & \text{falls } A_{i+1/2,j} \geq 0 \\ \min(R_{ij}^+, R_{i+1,j}^-), & \text{falls } A_{i+1/2,j} < 0 \end{cases}$$

$$C_{i,j+1/2} = \begin{cases} \min(R_{i,j+1}^+, R_{ij}^-), & \text{falls } A_{i,j+1/2} \geq 0 \\ \min(R_{ij}^+, R_{i,j+1}^-), & \text{falls } A_{i,j+1/2} < 0 \end{cases}$$

Wir wollen nun auf die von Zalesak vorgeschlagenen Differenzenverfahren zur Lösung von (15) eingehen. In Zeitrichtung lassen sie sich als Zweischritt-Prediktor-Korrektor-Verfahren charakterisieren:

$$\text{Prediktor: } w_i^t = w_i^{t-\Delta t} - 2 \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2}^t - F_{i-1/2}^t)$$

$$f_i^* = \frac{1}{2} (f_i^t + f_i^t)$$

$$\text{Korrektor: } w_i^{t+\Delta t} = w_i^t - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2}^* - F_{i-1/2}^*)$$

$$\text{mit } F^t = F(f^t), \quad F^* = F(f^*).$$

In seiner Notiz [3] behandelt Zalesak die auch in den Eulergleichungen vorkommende Form $f = vw + \bar{f}$ und setzt

$$(25) \quad F_{i+1/2}^C = \frac{2}{3} (w_{i+1} v_i + w_i v_{i+1}) - \frac{1}{12} (w_{i+2} v_i + w_i v_{i+2} + w_{i+1} v_{i-1} + w_{i-1} v_{i+1})$$

$$(26) \quad \bar{F}_{i+1/2} = \frac{7}{12} (\bar{f}_{i+1} + \bar{f}_i) - \frac{1}{12} (\bar{f}_{i+2} + \bar{f}_{i-1})$$

$$F_{i+1/2} = F_{i+1/2}^C + \bar{F}_{i+1/2},$$

um ein Verfahren 4. Ordnung zu erhalten. Die Übertragung dieser Formeln auf zwei Dimensionen ist trivial. (26) entsteht durch die Approximation

$$\bar{f}_x \approx \left(\frac{4}{3} D_0(h) - \frac{1}{3} D_0(2h)\right) \bar{f} \quad \text{mit}$$

$$D_0(h) \bar{f}(x) = \frac{1}{2h} (\bar{f}(x+h) - \bar{f}(x-h)) ,$$

die Kreiss und Oligier [5] näher analysiert haben. Zalesak legt in seiner Notiz dar, daß diese Differenzenapproximation für Terme der Form $(vw)_x$ weniger geeignet ist als sogenannte "ZIP"-Formeln wie für F_C . Sie entstehen, wenn man $(vw)_x$ in der Form $v_x w + v w_x$ schreibt und dann mit symmetrischen Differenzen approximiert. Man erreicht damit, daß im Abschneidefehler nur ungerade Ableitungen von w auftreten.

Als Verfahren niedriger Ordnung schlägt Zalesak in [3] einen Algorithmus von Rusanov [6] vor, den dieser zur Berechnung der Wechselwirkung zwischen Schocks und Hindernissen benutzte. Wir stellen ihn gleich in seiner zweidimensionalen Form dar:

Gegeben ist das System (24) von Erhaltungsgleichungen. Mit $s(x,y,t)$ wollen wir den maximalen Betrag der lokalen charakteristischen Geschwindigkeiten bezeichnen (im Falle der Eulergleichungen gilt $s = \|v\| + c$). Zur numerischen Lösung wird ein Gitter der Maschenweite $\Delta x, \Delta y$ und ein Zeitschritt Δt verwendet. Man setzt

$$h = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2} , \quad \kappa = \Delta t \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}} .$$

Das Verfahren lautet nun

$$(27) \quad w_{i,j}^n = w_{i,j}^a - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_{i+1/2,j} - F_{i-1/2,j}) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (G_{i,j+1/2} - G_{i,j-1/2}) + \frac{1}{2} (\phi_{i+1/2,j} - \phi_{i-1/2,j} + \psi_{i,j+1/2} - \psi_{i,j-1/2}) .$$

Dabei bezeichnen die hochgestellten Buchstaben n und a wieder die Lösung zum neuen bzw. alten Zeitpunkt. Ferner gilt

$$(28) \quad F_{i+1/2,j} = \frac{1}{2} (f_{i,j}^a + f_{i+1,j}^a) , \quad G_{i,j+1/2} = \frac{1}{2} (g_{i,j}^a + g_{i,j+1}^a) .$$

ϕ und ψ sind Dämpfungsterme:

$$(29) \quad \begin{aligned} \phi_{i+1/2,j} &= \frac{1}{2}(\alpha_{i,j}^a + \alpha_{i+1,j}^a)(w_{i+1,j}^a - w_{i,j}^a) \\ \psi_{i,j+1/2} &= \frac{1}{2}(\beta_{i,j}^a + \beta_{i,j+1}^a)(w_{i,j+1}^a - w_{i,j}^a) \end{aligned}$$

mit den Koeffizienten

$$(30) \quad \alpha_{ij}^a = \omega \kappa s_{ij}^a \left(\frac{\Delta y}{h}\right)^2, \quad \beta_{ij}^a = \omega \kappa s_{ij}^a \left(\frac{\Delta x}{h}\right)^2.$$

Die Parameter ω und Δt (und damit κ) müssen der Stabilitätsbedingung

$$(31) \quad (\kappa \cdot s_{ij}^a)^2 \leq \omega \kappa s_{ij}^a \leq 1$$

genügen. In praxi gibt man einen Wert $q < 1$ vor und berechnet Δt aus der Bedingung

$$(32) \quad \kappa s_{\max}^a = q, \quad s_{\max}^a = \max_{i,j} (s_{ij}^a).$$

Die Bedingung (31) für ω läßt sich umschreiben in

$$\kappa s_{ij}^a \leq \omega \leq \frac{1}{\kappa s_{ij}^a}$$

und führt mit (32) auf

$$q \leq \omega \leq \frac{1}{q}.$$

Auf diese Weise erhält man a-priori-Schranken für ω . Dieser Parameter entscheidet über die Stärke der numerischen Viskosität. Rusanov verwendete ausnahmslos $\omega > 1$ und in der Nähe der oberen Grenze $\frac{1}{q}$.

Zum Abschluß wollen wir noch die Eulergleichungen (1) - (3) in Erhaltungsform angeben. Dazu bezeichnen wir mit

$$E = \rho \left(e + \frac{1}{2} \|v\|^2 \right)$$

die Gesamtenergie pro Volumeneinheit und mit $m = \rho v$ den Impuls pro Volumeneinheit und erhalten die Gleichungen

$$(33) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v_y) = 0$$

$$(34) \quad \frac{\partial m_x}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (v_x m_x + p) + \frac{\partial}{\partial y} (v_y m_x) = 0$$

$$(35) \quad \frac{\partial m_y}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (v_x m_y) + \frac{\partial}{\partial y} (v_y m_y + p) = 0$$

$$(36) \quad \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} ((E+p)v_x) + \frac{\partial}{\partial y} ((E+p)v_y) = 0$$

4. Zusammenfassung

Nach erfolgreichen eindimensionalen Tests mit dem GAP-Algorithmus haben wir ihn in zweidimensionaler Form vektorisiert auf der CYBER implementiert und verschiedene Details des Verfahrens untersucht: Ein- und Ausströmrandbedingungen, "Formfunktion" der Teilchen (vgl. (14)), Energiegleichung, Differenzenverfahren in t.

Ferner begannen wir den Einfluß eines Hindernisses auf eine Stoßwelle zu untersuchen. Die dabei gewonnenen Ergebnisse geben das experimentell gefundene physikalische Geschehen qualitativ recht gut wieder.

Der Bericht schließt mit der Darstellung der FCT-Methode, die im nächsten Schritt mit dem GAP-Algorithmus verglichen werden soll.

Literatur

- [1] B.M. Marder: GAP - A PIC-Type Fluid Code, Mathematics of Computation 29 (1975), 434-446
- [2] S.T. Zalesak: Fully Multidimensional Flux-Corrected Transport Algorithms for Fluids. Journal of Computational Physics 31 (1979), 335-362
- [3] S.T. Zalesak: High Order "ZIP" Differencing for Convective Terms (Note). Journal of Computational Physics 40 (1981), 497-508
- [4] H.-U. Hassenpflug: Untersuchungen zur Wirbelbildung durch Beugung einer Stoßwelle (Dissertation). RWTH Aachen, Fakultät für Maschinenwesen, 1976
- [5] H.-O. Kreiss, J. Oliger: Comparison of accurate methods for the integration of hyperbolic equations. Tellus 24 (1972), 199-215
- [6] V.V. Rusanov: The Calculation of the Interaction of Non-Stationary Shock Waves and Obstacles. U.S.S.R. Computational Mathematics and Mathematical Physics 1 (1962), 304-320